

## **ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ФРАГМЕНТ СТРУКТУРЫ АЛЬБУМИНА**

*Люткин А.С., Петров А.С., Орлов В.Ю., Гаврилов Г.Б.*

Ярославский государственный университет  
150003, г. Ярославль, ул. Советская, д. 14

В настоящее время очень активно развиваются методы компьютерного моделирования биологических макромолекул. Ранее для расчета таких систем достаточно активно применялись методы молекулярной механики с оптимизацией структуры узловых фрагментов. На сегодняшний день использование аппарата современной квантовой химии позволяет проводить расчеты геометрии не только узловых молекул, но и целой системы, а также позволяет учитывать влияние различных факторов на пространственную и электронную структуры, динамику различных процессов (в том числе разделение, преобразование, взаимодействие с материалом и т.д.).

Нами было изучено влияние различного количества молекул растворителя (от 1 до 14), в качестве которого выступала вода, на фрагмент белка альбумина, состоящего из 10 аминокислотных последовательностей (GLU-VAL-GLN-LEU-LEU-GLU-SER-GLY-GLY-GLY). Исходная Z-матрица фрагмента белка была получена из банка данных 3D структур белков и нуклеиновых кислот (Protein Data Bank). Моделирование влияния растворителя проводилось в ряде программ – полуэмпирическим методом PM7 в Морас2016, неэмпирическим методом STO-2G в Firefly Gamess.

Было установлено, что для получения эффектов влияния среды достаточно наличие 4 молекул воды, находящихся во взаимодействии с фрагментом белка альбумина. В рамках квантово-химического моделирования была проведена оптимизация системы и рассчитаны термодинамические величины.

## **СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ МЕДИ (II) С 3-((E)-2- ГИДРОКСИБЕНЗИЛИДЕН)ГИДРОЗОНО)ИНДОЛИН-2-ОНОМ**

*Мамедова Ч.А., Алиева Ф.С., Шыхалиев Н.Г., Чырагов Ф.М.*

Бакинский государственный университет  
1148, г. Баку, ул. 3. Халилова, д. 23

На основе салицилового альдегида нами было синтезирован новый реагент : 3-((E)-2-гидроксibenзилиден)гидразоно)индолин-2-он.